

В полученном ИК-спектре (см. рисунок) присутствуют полосы с максимумами при  $432\text{ см}^{-1}$ ,  $917\text{ см}^{-1}$  и  $788\text{ см}^{-1}$  характерные для комплексных солей уранилфторида. Полоса при  $432\text{ см}^{-1}$  связана с асимметричными валентными колебаниями связи U-F. Полосы с максимумами при  $917\text{ см}^{-1}$  и  $788\text{ см}^{-1}$  обусловлены, соответственно, симметричными и асимметричными валентными колебаниями связи U=O в ионе уранила. В исследуемой области также присутствует ряд полос, связанных с колебаниями  $\text{NH}_2$  групп, положение максимумов которых характерно для комплексных соединений галогенидов металлов с гидразином. Острый пик при  $598\text{ см}^{-1}$  относится к асимметричным маятниковым колебаниям  $\text{NH}_2$  групп. Полоса с интенсивным двойным максимумом при  $1124\text{ см}^{-1}$  и  $1156\text{ см}^{-1}$  обусловлена вращательными колебаниями  $\text{NH}_2$  групп. Две слабые полосы при  $1340\text{ см}^{-1}$  и  $1382\text{ см}^{-1}$  связаны с веерными колебаниями  $\text{NH}_2$  групп. В области  $2200\text{--}3600\text{ см}^{-1}$  наблюдается наложение полос, связанных с валентными колебаниями связи O-H и  $\text{NH}_2$  групп. В области  $1500\text{--}1700\text{ см}^{-1}$  наблюдается наложение полос, обусловленных деформационными колебаниями  $\text{NH}_2$  групп (максимумы  $1522\text{ см}^{-1}$  и  $1567\text{ см}^{-1}$ ) и деформационными ножничными колебаниями связи O-H (максимум  $1630\text{ см}^{-1}$ ). Присутствие последней полосы указывает на наличие в структуре соединения молекул воды и, тем самым, однозначно подтверждает его кристаллогидратный характер.

Данные ИК-спектроскопии согласуются с результатами химического анализа и подкрепляют предположение об осаждении урана в ходе исследованного процесса резкстракции в виде кристаллогидрата уранилгидразиний фторида.

## ДИМЕРИЗАЦИОННОЕ РАВНОВЕСИЕ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ С САМОАССОЦИАЦИЕЙ В МОДЕЛИ ТВЕРДЫХ СФЕР

*Давыдов А.Г.<sup>(1)</sup>, Ткачев Н.К.<sup>(2)</sup>*

<sup>(1)</sup> Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

<sup>(2)</sup> Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН  
620137, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

Цель сообщения – представить результаты расчета характеристик димеризационного равновесия в бинарной системе, в которой атомы полагаются твердыми сферами и способны к самоассоциации.

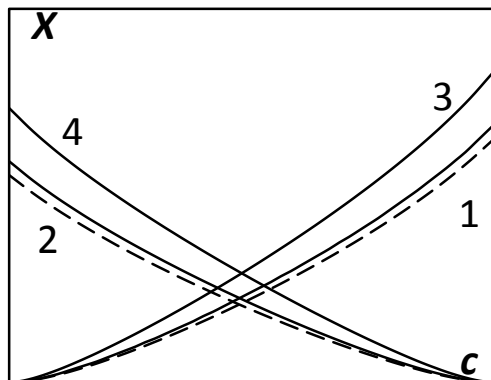
В работе рассматривается простейшая сферическая модель димерных молекул в бинарной системе  $A_c B_{1-c}$ , где частицы компонен-

тов  $A$  и  $B$  могут димеризоваться в результате протекания самопроизвольных реакций:  $2A_1 = A_2$  и  $2B_1 = B_2$ .

Концентрации одиночных атомов типа  $A$  и  $B$  равны:  $x_{A_1} = c(1 + x + y) - 2x$ ,  $x_{B_1} = 1 - c(1 + x + y) + x - y$ , где  $x$  и  $y$  концентрации димеров различного состава. Атомы  $A$  и  $B$  представляются твердыми сферами различных диаметров ( $d_A = d$ ,  $d_B = \xi d$ ). Величина слияния атомов при димеризации управляется безразмерными параметрами  $\lambda$  и  $\chi$ . Положение равновесия системы при постоянных давлении и температуре или минимум свободной энергии Гиббса должен быть найден в данном случае по трем независимым переменным: объему смеси и концентрациям димеров разного сорта. Это приводит к системе трех уравнений, состоящей из двух уравнений закона действующих масс (ЗДМ) и уравнения состояния (УС). В работе использованы два приближения статистической теории: аппроксимация ван-дер-ваальсовского типа и теория Перкуса-Йевики для смесей твердосферных частиц различного диаметра.

Был проведен расчет равновесных характеристик таких бинарных жидких растворов в зависимости от состава с различными значениями параметров теории (энергии диссоциации, соотношение атомных диаметров, степень слияния атомов в димерах типа  $A$  и  $B$ ).

На рисунке ниже представлены концентрационные зависимости содержания димеров в смеси  $A_c B_{1-c}$ . Кривые 1 и 2 соответствуют  $x$  (концентрации димеров сорта  $A$ ) и  $y$  (концентрации димеров сорта  $B$ ) в приближении ван-дер-ваальсовского типа, соответственно. Кривые 3 и 4 соответствуют  $x$  и  $y$  в теории Перкуса-Йевики. Пунктиром обозначен идеальный случай.



Концентрационные зависимости содержания димеров в смеси  $A_cB_{1-c}$

В работе проанализированы несколько возможных случаев самоассоциации в бинарном жидком растворе. Сделан вывод о важной роли изменений плотности для термодинамики таких растворов, а также о заметных отклонениях поведения химических равновесий от идеальности.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №15-03-01588.*

## **ПОЛУЧЕНИЕ МАНГАНИТА ЛАНТАНА, ДОПИРОВАННОГО ВИСМУТОМ И МЕДЬЮ**

*Данилова В.В., Каймиева О.С.*

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

В наше время проблема поиска новых электродных материалов, как альтернатива дорогостоящим металлам, не потеряла своей значимости. Актуальными являются исследования, направленные на усовершенствование и получение катализаторов, которые проявляют высокую активность по отношению к реакции синтеза метанола путем гидрирования диоксида углерода. Перспективными являются перовскитоподобные соединения общей формулы  $ABO_3$ . Благодаря своим уникальным свойствам (высокие значения электропроводности и каталитической активности) замещенные манганиты лантана привлекают наибольшее внимание.